



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2019/2020



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Química Computacional		
CÓDIGO TFG	QO-19/20-02		
TIPOLOGÍA	A1	Nº ALUMNOS	1
OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>	
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>	

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Departamento de Química Orgánica		
DIRECCIÓN POSTAL	Facultad de Ciencias. Avda Fuente Nueva, s/n		
LOCALIDAD	Granada	C.P.	18071
TELÉFONO	958243320	E-MAIL	qorgani@ugr.es

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
APELLIDOS, NOMBRE	Dobado Jiménez, José Antonio		
DEPARTAMENTO	Departamento de Química Orgánica		
CARGO(*)	Catedrático		
TELÉFONO	958243186	E-MAIL	dobado@ugr.es
TUTOR 2 (Rellenar en caso de haber un segundo tutor)			
APELLIDOS, NOMBRE			
DEPARTAMENTO			
CARGO(*)			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
APELLIDOS, NOMBRE			
EMPRESA			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

(*) Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

Una vez cumplimentado y firmado deberá ser enviado junto con el resto de propuestas del departamento en formato pdf al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción. En el presente TFG se abordarán por un lado las metodologías actuales más relevantes de métodos de cálculo y su clasificación (métodos ab initio, semiempíricos, DFT y mecánica molecular) así como los aspectos prácticos de la Química Computacional del manejo de los programas informáticos de modelización molecular.	
Objetivos. El alumno aprenderá a manejar los diferentes módulos en los que consta todo programa genérico de modelización molecular, utilizando dichas herramientas a la resolución de ejemplos prácticos sencillos dentro del área de la Química Orgánica.	
Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo. 1) Revisión de los aspectos teóricos más generales sobre química computacional y metodologías de cálculo. 2) Revisión bibliográfica y selección de los sistemas modelo a estudiar. 3) Análisis de los antecedentes de estudios mecano-cuánticos de sistemas similares, así como de potenciales aplicaciones. 4) Aprendizaje y uso de herramientas de Modelización Molecular, comandos básicos de Unix/Linux y uso del cluster de supercomputación y entorno de red Alhambra para ejecución de cálculos moleculares. 5) Diseño molecular y análisis conformacional de los sistemas modelo a estudiar. 6) Optimización geométrica y validación de los puntos estacionarios obtenidos mediante análisis vibracional a nivel de teoría semiempírico y Hartree-Fock (HF). 7) Refinamiento final y estudio energético empleando métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). 8) Estudio de las propiedades electrónicas y energéticas de los sistemas modelo. 9) Composición de tablas y figuras de forma resumida con información procedente de los cálculos moleculares. Comparación e interpretación de los resultados. 10) Elaboración de las conclusiones según los resultados obtenidos, metodología usada y objetivos del trabajo marcados. 11) Redacción del TFG y maquetación de los resultados usando herramientas de edición de textos científicos, LATEX (opcional).	
Fecha prevista comienzo: Octubre 2019	Duración prevista (meses): 7

Fecha: 08/05/2019

FIRMAS

DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO	DIRECTOR DE LA INSTITUCIÓN/EMPRESA
Fdo.: Andrés Parra Sánchez	Fdo.: _____
TUTOR 1/TUTOR ACADÉMICO	TUTOR 2/TUTOR DE LA INTITUCIÓN/EMPRESA
Fdo.: José Antonio Dobado Jiménez	Fdo.: _____